

Bioinformatika III

Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

Paskaita 10
nekovalentinės sąveikos
baltymuose

Saulius Gražulis
2026 m.

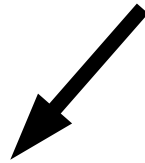
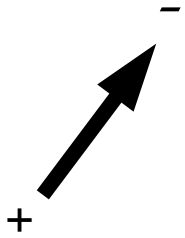
Nekovalentinės sąveikos baltymuose

- Van der Valso (Van der Waals) sąveika
- Vandeniliniai ryšiai
- Hidrofobinė sąveika
- Elektrostatinė sąveika
- (Jonų- π elektronų sąveika)

Van der Valso (Van der Waals) sąveika

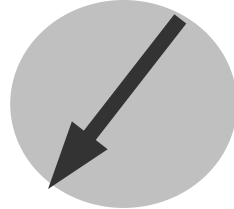
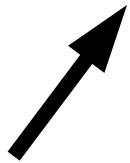
- Traukos jėgos:
 - dipolio – dipolio sąveika
 - dipolio – indukuoto dipolio sąveika
 - dviejų indukuotų dipolių sąveika
- Atostūmio jėgos
 - elektronų orbitalių atostūmis, paaiškinamas Paulio principu
- Ryšio energija: 0.4—2.0 kJ/mol (0.1—0.5 kcal/mol)

Van der Valso (Van der Waals) sąveika (2)



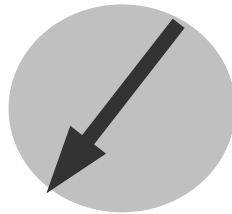
Keesom'o sąveika:

$$U = -\frac{C_{Keesom}}{r^6}$$



Debajaus (Debye) sąveika:

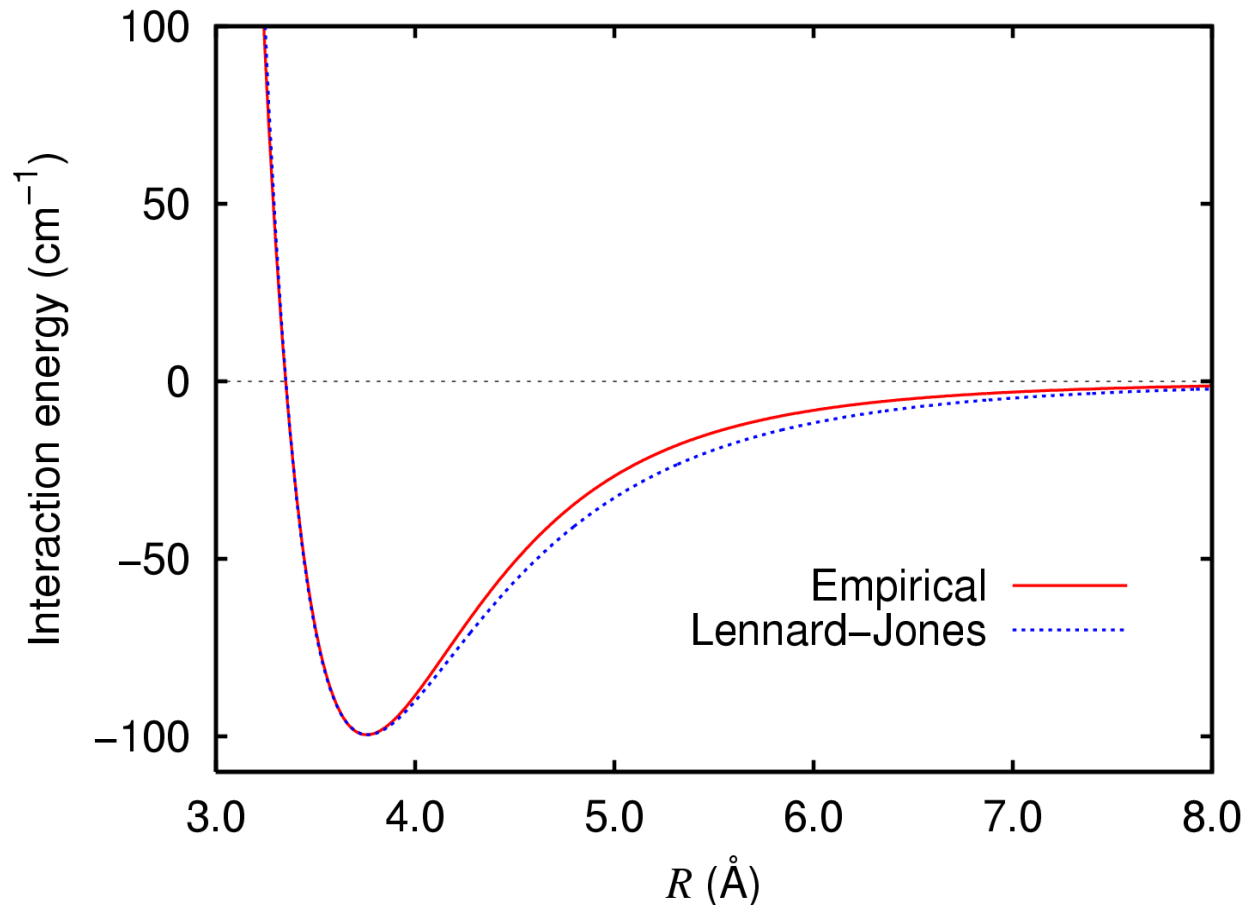
$$U = -\frac{C_{Debye}}{r^6}$$



Londono dispersinės jėgos:

$$U = -\frac{C_{London}}{r^6}$$

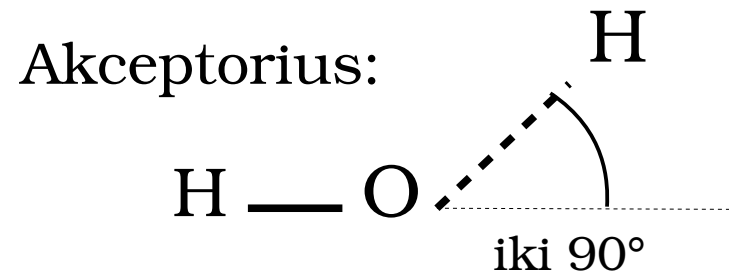
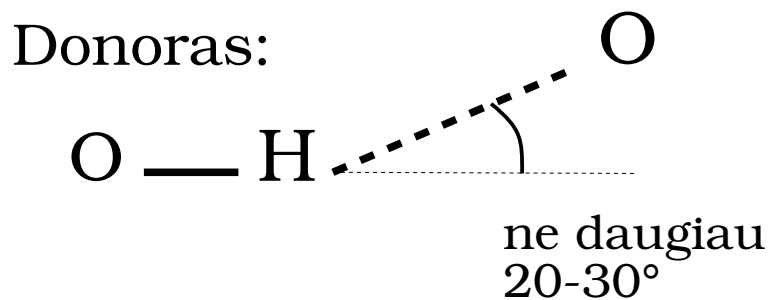
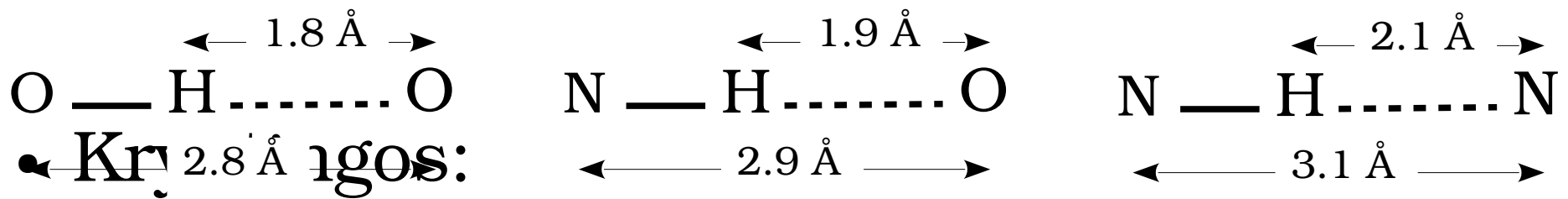
Lenardo-Džonso potencialai (Lennard-Jones potential)



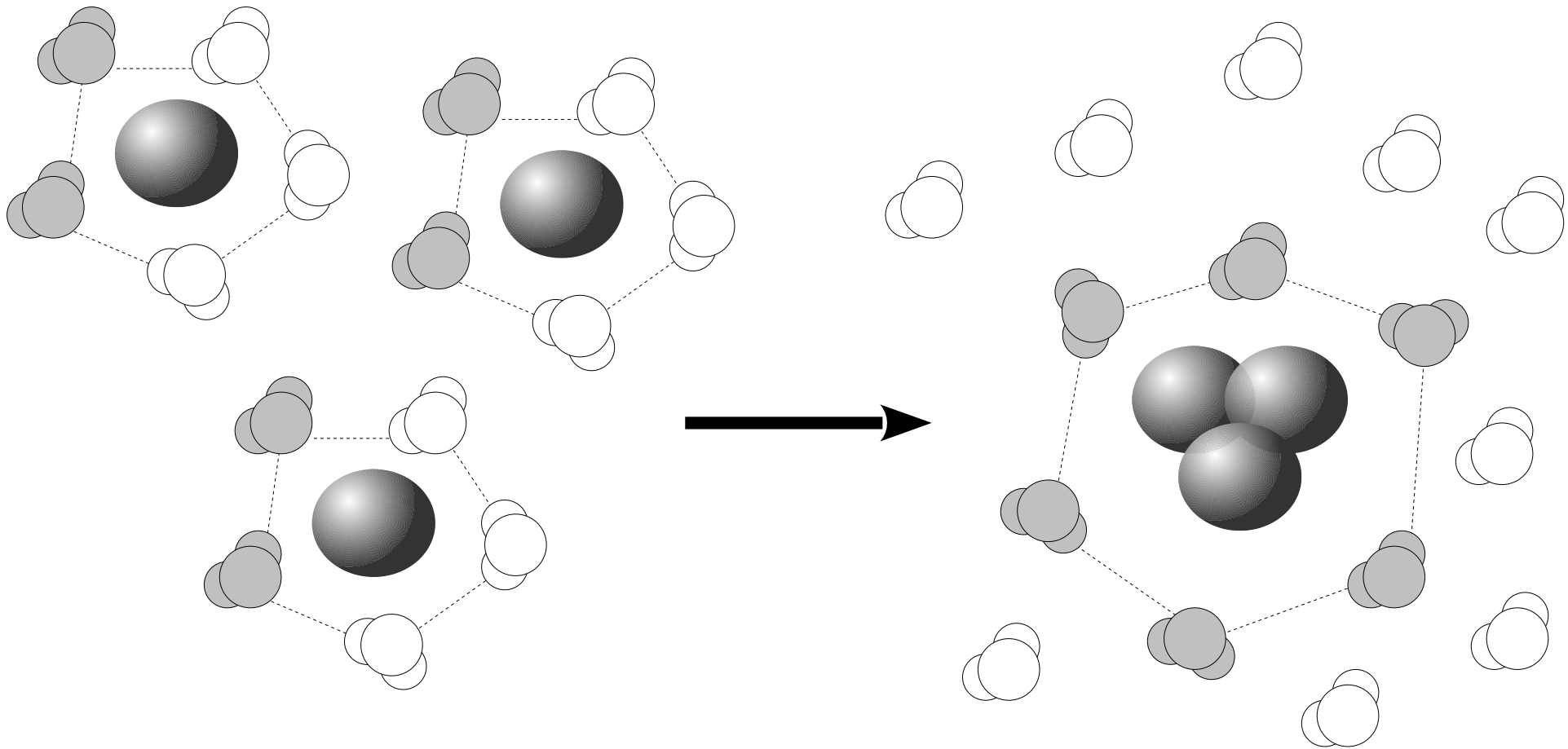
$$V(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Vandenilinės jungtys

- Energija 20 — 40 kJ/mol (5 — 10 kcal/mol)
- Ilgis 2.8 – 3.1 Å

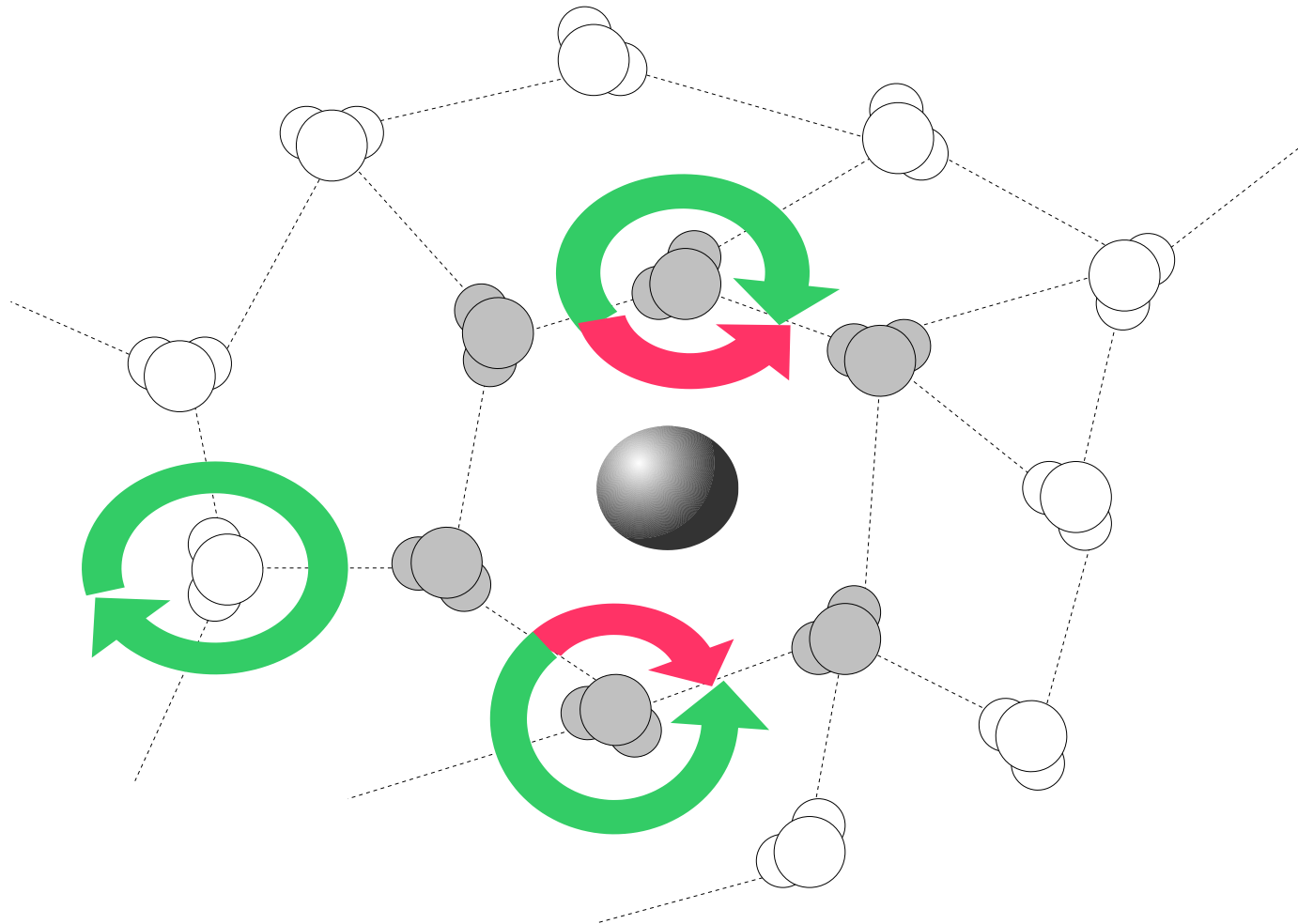


Hidrofobinė sąveika *a la* Karshikoff



Andrey Karshikoff *Non-covalent interactions in proteins*, Imperial College Press, 2006, p. 99

Hidrofobinė sąveika *a la* Finkelštein



А. В. Финкельштейн, О. Б. Птицын, *Физика белка*,
Москва, КДУ, 2005, psl. 61 ir toliau

Hidrofobiškumas

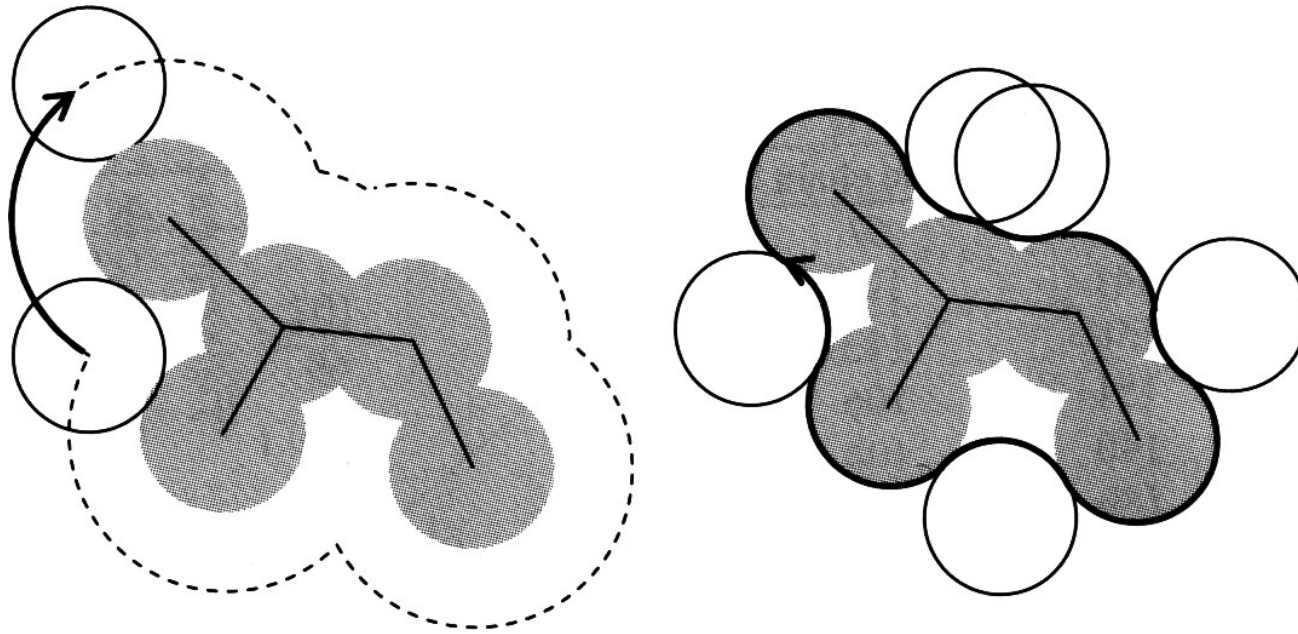
- Amino rūgšties perkėlimo į hidrofobinę aplinką laisvąją energiją (ΔG_t) galime suskaidyti į glicino perkėlimo ΔG_t^{Gly} ir šoninės grandinės perkėlimo energiją (hidrofobiškumą) Δg_t :

$$\Delta G_t = \Delta G_t^{\text{Gly}} + \Delta g_t$$

Hidrofobiškumas ir pavirčiaus plotas

- Efektas adityvus ir skirtingoms šoninių grandinių dalims
- Hidrofobiškumas proporcingas alifatinės grandinės tirpikliui prieinamam paviršiui

Tirpikliui prieinamas paviršius



Elektrostatinė sąveika

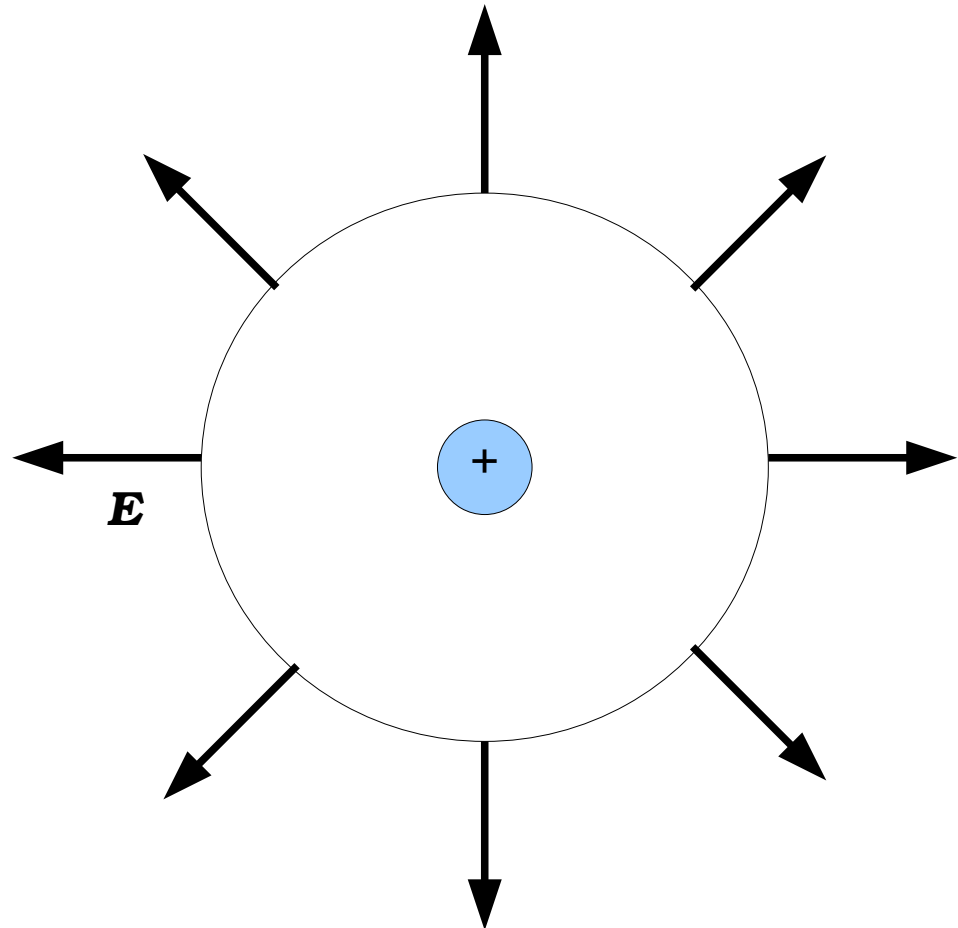
- Kulono (Coulomb) dėsnis
- Debajaus-Hiukelio (Debye-Hückel) teorija
- Borno (Born) lygtis
- Puasono-Bolcmano (Poisson-Boltzmann) lygtis

Kulono (Coulomb) dèsnis

$$F = k_0 \frac{q_1 q_2}{r^2}$$

$$k_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} = 9 \cdot 10^9 [m/F]$$

$$\epsilon \epsilon_0 \nabla^2 \varphi = -\rho$$

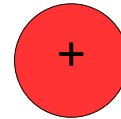


Solvatacijos energijos

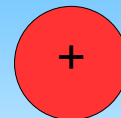
Sferiniam jonui: Borno formulė

$$\Delta G_{transfer} = 116 \frac{q^2}{r} \left(\frac{1}{\epsilon_2} - \frac{1}{\epsilon_1} \right)$$

Bet kokios formos dalelei:
P-B lygties sprendimas

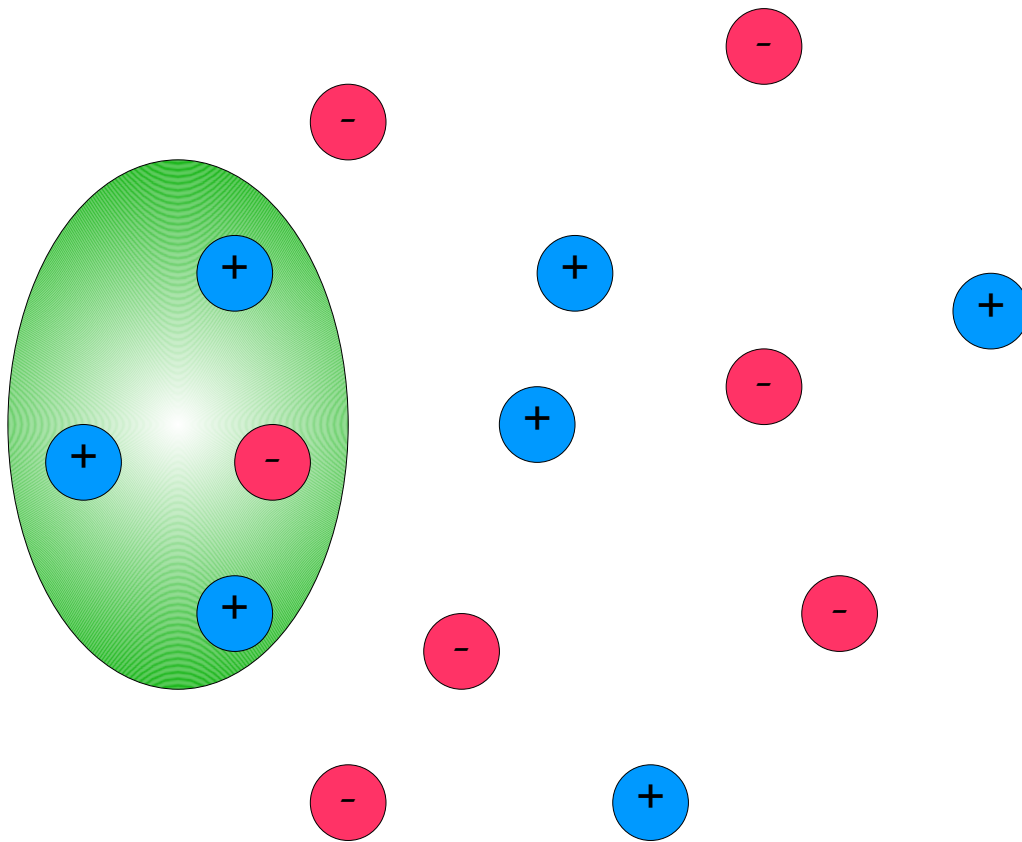


$$\epsilon = 1$$



$$\epsilon = 78$$

Krūvių pasiskirstymas aplink molekulę



Puasono lygtis:

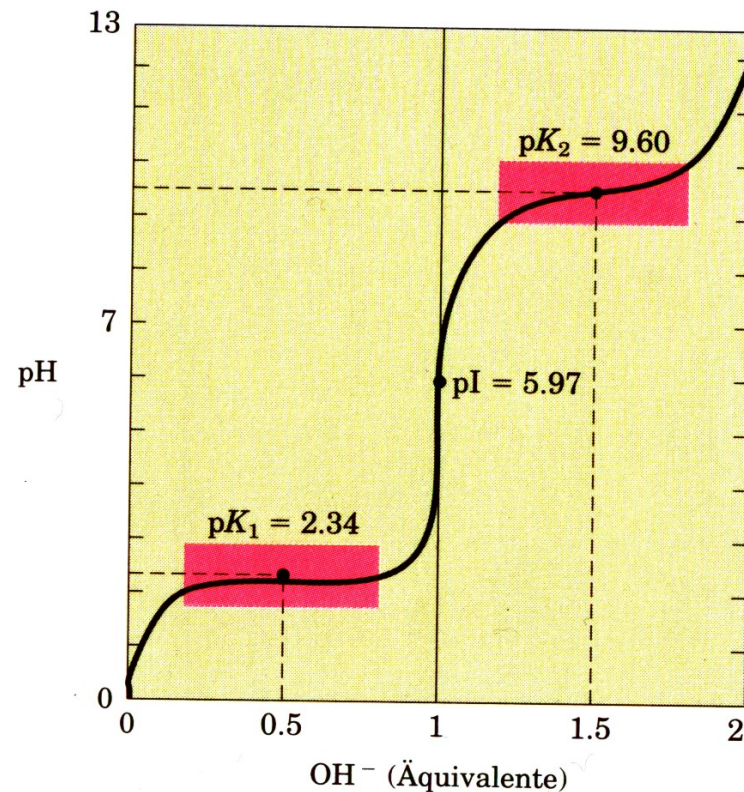
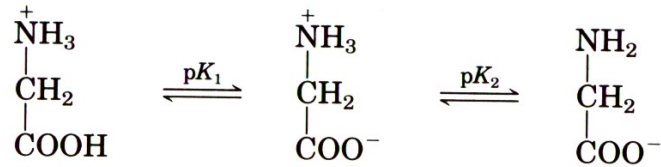
$$\epsilon_0 \nabla(\epsilon(\vec{r}) \nabla \varphi) = -\rho$$

Bolcmano pasiskirstymas:

$$\rho_i = z_i c_i = z_i c_{i0} e^{-\frac{z_i \varphi}{kT}}$$

$$\epsilon_0 \vec{\nabla}(\epsilon(\vec{r}) \vec{\nabla} \varphi) = -\rho_p - \sum_i z_i c_{i0} e^{-\frac{z_i \varphi}{kT}}$$

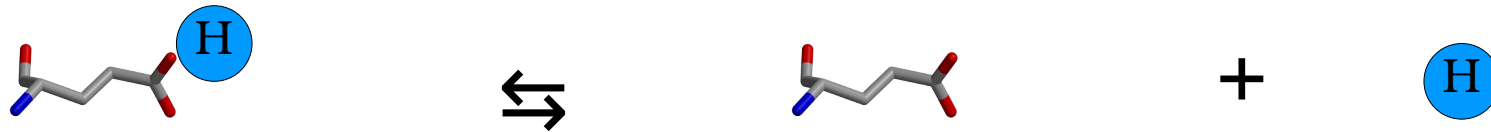
Baltymų jonizacijos pusiausvyros



Lokalius pK reikšmės

In aqua:

$$\Delta G = -RT \ln K = 2.3RT pK$$
$$pK = -\lg K$$



↕ ΔG_1
P-B sprendinys 1

↕ ΔG_2
P-B sprendinys 2

↕ $\Delta G = 0$

